

## Supplementary Information

### Determining the most relevant crystal structure to virtually identify type 1 inhibitors of c-Met: Part A

Khushboo Begwani & Urmila Joshi\*

Department of Pharmaceutical Chemistry, Prin. K. M. Kundnani College of Pharmacy, Cuffe Parade,  
Colaba, Mumbai 400 005, India

E-mail: urmila.joshi1365@gmail.com

Received 21 March 2024; accepted (revised) 29 May 2024

#### Contents:

Table of contents	Page
Table S1 a) Self-docking on 28 crystals of c-Met	S2
Table S1 b) Self-docking on 28 crystals of c-Met	S2
Table S2 a) RMSD for cross-docking of c-Met 2WGJ crystal	S3
Table S2 b) RMSD for cross-docking of c-Met 3F66 crystal	S3
Table S2 c) RMSD for cross-docking of c-Met 3ZXZ crystal	S4
Table S2 d) RMSD for cross-docking of c-Met 3ZZE crystal	S4
Table S2 e) RMSD for cross-docking of c-Met 4AOI crystal	S5
Table S2 f) RMSD for cross-docking of c-Met 4AP7 crystal	S5
Table S2 g) RMSD for cross-docking of c-Met 4DEH crystal	S6
Table S2 h) RMSD for cross-docking of c-Met 4XYF crystal	S6
Table S2 i) RMSD for cross-docking of c-Met 5EOB crystal	S7
Table S2 j) RMSD for cross-docking of c-Met 5UAB crystal	S7
Table S2 k) RMSD for cross-docking of c-Met 5YA5 crystal	S8
Table S2 l) RMSD for cross-docking of c-Met 73BQ crystal	S8
Table S2 m) RMSD for cross-docking of c-Met 7B3V crystal	S9
Table S2 n) RMSD for cross-docking of c-Met 7B3Z crystal	S10
Table S2 o) RMSD for cross-docking of c-Met 7B40 crystal	S10
Table S2 p) RMSD for cross-docking of c-Met 7B41 crystal	S11
Table S2 q) RMSD for cross-docking of c-Met 7B42 crystal	S11
Table S2 r) RMSD for cross-docking of c-Met 7B43 crystal	S12
Table S2 s) RMSD for cross-docking of c-Met 7B44 crystal	S12

Table S1 a) Self-docking on 28 crystals of c-Met

Crystal	2WGJ	3F66	3ZCL	3ZXZ	3ZZE	4AOI	4AP7	4DEG	4DEH	4R1V	4R1Y	4XMO	4XYF	5EOB
	1.89	0.76	3.37	1.60	0.77	0.10	0.21	2.32	0.12	1.33	1.58	2.63	0.61	0.15
	1.82	0.21	2.38	0.71	0.77	0.76	0.23	2.01	1.07	1.99	1.00	2.81	1.46	0.58
	1.09	0.43	3.54	1.79	1.26	1.02	1.11	2.44	2.58	2.03	2.17	2.54	1.32	2.03
	2.07	2.02	3.62	0.13	1.89	0.52	1.74	2.19	1.07	2.21	1.97	2.58	1.21	1.76
	1.22	1.26	3.59	0.82	1.72	1.08	1.75	2.43	2.21	2.65	2.39	2.97	1.26	1.60
	0.98	0.92	2.51	0.47	2.13	3.21	0.29	2.13	2.03	3.51	2.54	2.70	1.68	2.19
	2.34	1.21	2.86	0.93	1.58	2.22	0.32	2.18	1.95	2.65	2.38	2.60	2.57	1.69
	2.44	0.75	2.37	0.63	2.07	2.38	0.58	1.65	2.09	2.39	4.28	3.83	2.12	0.58
	1.92	0.40	2.04	1.51	2.43	2.29	2.17	2.79	2.77	2.77	1.63	2.42	1.43	2.02
	2.11	1.92	1.49	2.15	2.14	1.63	-	2.18	2.71	3.11	2.40	3.05	2.53	2.07
AVERAGE RMSD	1.79	0.99	2.78	1.07	1.67	1.52	0.93	2.23	1.86	2.46	2.24	2.81	1.62	1.47

Table S1 b) Self-docking on 28 crystals of c-Met

Crystal	5EYC	5EYD	5HNI	5UAB	5YA5	6UBW	7B3Q	7B3V	7B3Z	7B40	7B41	7B42	7B43	7B44
	0.09	1.61	1.02	0.08	0.31	0.20	0.10	0.18	0.12	3.00	1.73	1.73	0.91	0.94
	1.04	1.21	0.42	1.77	0.65	1.28	1.25	2.18	0.96	1.53	2.07	1.62	0.38	0.39
	1.93	2.69	2.27	1.86	1.80	2.23	1.95	2.19	1.89	1.27	0.90	0.95	1.52	0.03
	2.15	1.91	2.34	1.63	0.85	2.22	0.52	0.10	2.20	1.34	1.09	1.50	1.36	0.92
	1.70	1.23	2.35	1.71	2.55	2.41	2.16	2.16	1.25	0.98	1.62	2.23	1.75	0.45
	2.71	1.59	3.39	2.03	2.21	1.88	2.26	2.21	1.73	1.49	1.69	1.45	1.61	0.13
	2.85	1.43	2.40	1.81	2.39	2.47	0.22	2.18	1.57	1.66	1.84	1.71	1.69	0.95
	2.88	3.67	2.99	1.82	2.04	2.20	1.96	2.20	1.66	0.47	1.59	2.17	0.68	0.90
	2.05	1.66	1.47	1.27	2.03	3.85	1.86	0.20	1.99	1.59	0.91	2.59	1.35	0.27
	2.86	3.64	3.38	0.95	2.08	3.50	2.02	2.20	1.86	2.08	1.24	2.13	1.89	0.94
AVERAGE RMSD	2.03	2.06	2.20	1.49	1.69	2.23	1.43	1.58	1.52	1.54	1.47	1.81	1.31	0.59

Table S2 a) RMSD for cross-docking of c-Met 2WGJ crystal

Non-cognate ligands	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	1.28	2.19	2.25	0.39	1.76	1.18	3.82	1.01	0.36	0.21	1.86	0.27	1.73	2.05	2.50	2.40	2.20	0.11
	2.03	0.34	2.19	0.41	1.71	0.51	3.77	1.00	1.80	0.79	1.16	0.66	2.54	2.22	2.67	2.59	2.34	0.08
	1.05	0.88	2.62	1.72	1.77	1.32	3.76	2.58	1.93	2.04	1.05	2.07	2.55	1.71	2.22	3.29	2.43	0.94
	1.76	1.43	2.61	1.63	1.77	2.49	3.62	2.11	1.98	1.77	0.86	2.12	0.81	2.61	2.18	2.93	1.95	0.06
	1.93	2.01	2.41	2.79	0.32	1.89	2.61	2.55	1.29	1.95	0.72	2.17	0.20	1.86	2.37	2.46	3.09	0.93
	1.80	0.80	2.31	2.16	0.21	1.98	3.64	2.98	0.87	2.13	1.93	0.39	0.89	2.15	2.19	2.04	2.02	0.93
	0.93	1.85	2.34	1.61	1.78	2.91	4.02	2.50	2.37	2.35	2.15	0.48	2.08	2.91	3.02	2.88	3.17	0.92
	1.11	1.24	1.10	2.46	0.27	2.88	1.88	2.75	2.80	1.74	1.18	2.22	2.17	1.74	1.86	3.18	2.88	0.93
	1.52	1.17	2.50	1.71	0.27	2.05	4.01	2.54	2.44	2.66	2.02	0.33	1.05	1.63	2.80	1.90	2.29	0.94
	1.48	0.94	2.23	3.03	1.73	2.27	3.94	2.79	1.66	2.39	2.00	0.22	1.19	2.76	2.01	1.97	2.62	0.05
AVERAGE RMSD	1.49	1.28	2.26	1.79	1.16	1.95	3.51	2.28	1.75	1.80	1.49	1.09	1.52	2.17	2.38	2.56	2.50	0.59

Table S2 b) RMSD for cross-docking of c-Met 3F66 crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	1.49	0.70	2.46	0.35	0.68	1.07	1.29	0.83	0.18	0.27	1.85	0.28	1.70	1.97	2.45	2.00	2.13	0.06
	1.93	1.16	2.46	0.65	0.70	0.44	1.55	0.46	0.51	0.43	2.01	2.22	1.71	2.08	3.33	3.51	2.10	0.91
	1.11	1.13	2.42	0.28	0.99	1.24	3.79	0.50	1.81	1.78	0.89	2.20	2.51	2.76	3.37	2.45	2.37	0.93
	1.55	0.30	1.43	0.72	1.02	0.84	3.73	2.09	1.77	1.77	2.30	2.21	2.36	3.10	3.06	3.07	2.00	0.93
	2.15	0.59	2.21	3.10	0.31	2.01	3.88	0.88	1.77	0.76	1.10	2.26	2.76	1.80	2.92	2.87	3.06	0.05
	2.20	0.70	2.36	2.41	0.67	2.17	3.83	1.78	1.83	2.35	2.03	2.10	1.80	3.25	3.17	1.80	3.06	0.93
	2.05	0.69	1.65	3.08	0.54	2.17	3.91	2.10	0.93	2.48	1.21	2.17	2.44	3.06	2.57	3.31	3.34	0.93
	2.40	1.67	1.64	2.26	0.15	1.99	3.13	1.25	1.86	2.38	2.00	0.33	1.92	2.84	3.11	3.33	3.26	0.16
	1.96	0.96	2.44	1.67	0.53	2.04	4.23	1.32	1.77	1.90	0.82	1.77	0.77	2.96	3.20	2.46	2.34	0.07
	2.60	0.92	2.45	1.83	0.40	2.65	3.15	2.09	2.71	1.91	1.20	0.28	0.72	2.53	2.22	2.14	3.22	0.93
AVERAGE	1.94	0.88	2.15	1.64	0.60	1.66	3.25	1.33	1.51	1.60	1.54	1.58	1.87	2.63	2.94	2.69	2.69	0.59

RMSD																			
------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

Table S2 c) RMSD for cross-docking of c-Met 3ZXZ crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	1.24	1.17	1.16	0.47	0.24	0.25	4.48	0.35	0.46	0.15	2.07	0.50	1.69	2.02	2.40	2.22	2.08	0.14
	1.48	1.95	2.97	0.21	0.21	1.04	4.65	0.39	1.84	0.67	1.81	0.47	2.48	1.97	2.03	2.30	1.95	0.94
	1.97	1.74	2.49	2.20	0.53	0.45	4.66	2.02	1.81	1.80	1.27	0.26	1.73	1.74	2.03	2.32	2.96	0.06
	1.10	1.38	2.43	2.41	0.53	1.00	2.58	1.44	0.74	1.90	2.21	0.16	2.48	2.59	3.07	1.98	1.80	0.93
	2.16	0.44	2.43	2.21	1.67	2.15	4.01	2.30	1.60	1.73	2.10	0.75	2.45	2.52	1.74	2.68	2.12	0.92
	1.58	1.72	2.97	1.64	1.66	2.58	1.73	2.02	1.15	1.49	2.12	0.26	0.90	2.03	2.89	2.76	2.84	0.07
	2.21	1.15	1.30	1.02	2.12	2.91	1.62	0.53	1.76	2.02	1.15	2.21	1.97	1.41	2.28	2.86	3.00	0.92
	1.76	1.27	2.07	2.03	2.13	2.03	2.65	1.86	1.19	1.86	1.05	0.19	0.75	1.86	1.58	2.13	2.86	0.93
	1.90	1.99	2.51	1.92	0.49	2.89	2.89	2.46	1.13	1.82	1.94	2.20	2.19	1.55	1.92	3.04	2.08	0.92
	2.31	1.88	2.20	2.49	0.67	1.94	2.83	3.01	2.27	2.37	2.20	0.20	2.02	1.77	1.92	2.09	2.83	0.93
AVERAGE RMSD	1.77	1.47	2.25	1.66	1.03	1.72	3.21	1.64	1.39	1.58	1.79	0.72	1.87	1.95	2.19	2.44	2.45	0.68

TABLE S2 d) RMSD for cross-docking of c-Met 3ZZE crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	1.88	1.76	2.53	1.07	0.66	1.25	4.63	0.25	0.97	0.35	2.25	2.04	0.52	1.26	1.58	2.00	1.81	0.94
	2.29	2.10	3.34	0.41	1.25	2.91	1.41	2.31	2.15	1.83	0.82	0.38	1.87	1.68	1.97	1.47	2.06	0.92
	2.41	1.27	1.99	2.51	0.24	2.04	2.51	3.12	1.32	1.83	0.91	2.07	0.58	1.85	2.47	2.20	1.80	0.06
	2.58	1.45	2.99	2.62	1.03	2.41	2.18	3.00	1.78	0.62	0.95	0.80	1.99	1.37	2.15	2.98	2.24	0.07
	2.48	1.38	3.39	1.95	0.46	2.05	3.53	2.67	1.80	0.89	1.73	0.31	1.97	1.86	1.56	2.95	2.67	0.05
	2.39	1.37	2.51	1.95	0.80	2.12	4.58	2.96	2.29	2.08	0.90	0.14	1.94	2.63	2.11	3.01	1.92	0.93
	2.66	1.17	2.46	1.82	0.91	2.92	3.40	3.40	2.40	1.75	2.05	2.06	1.96	2.82	2.11	2.78	1.52	0.93
	1.86	1.06	2.74	2.64	0.36	2.65	3.52	2.60	2.05	1.05	2.10	0.18	2.23	2.61	3.03	2.72	3.04	0.94
	2.51	1.95	2.74	2.95	0.80	1.90	1.70	2.70	2.69	1.75	1.95	2.22	2.09	2.76	3.02	1.96	1.98	0.93

	1.81	1.81	2.23	2.03	0.54	-	3.56	3.21	1.89	1.64	1.22	0.30	0.71	2.53	2.83	2.35	2.81	0.93
AVERAGE RMSD	2.29	1.53	2.69	1.99	0.70	2.25	3.10	2.62	1.93	1.38	1.49	1.05	1.59	2.14	2.28	2.44	2.18	0.67

Table S2 e) RMSD for cross-docking of c-Met 4AOI crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	2.18	0.52	1.55	1.52	0.11	0.34	1.40	0.43	0.28	0.29	2.02	2.04	1.66	1.90	2.39	2.29	2.00	0.24
	1.50	1.27	0.63	1.62	0.10	0.56	1.64	0.32	0.63	1.84	1.77	0.42	1.65	2.80	2.35	3.04	2.11	0.09
	2.15	1.40	0.92	1.75	0.43	1.04	1.48	0.68	1.72	1.30	1.19	0.16	1.72	1.72	2.02	2.02	2.91	0.91
	1.51	1.43	1.82	2.77	0.46	2.53	2.58	2.29	1.73	2.06	2.23	2.22	2.46	1.99	2.06	2.13	1.83	0.88
	0.45	1.64	1.94	2.36	1.70	1.85	4.31	1.96	1.74	1.92	1.25	2.19	0.79	1.60	3.08	2.63	2.73	0.90
	1.07	1.26	0.59	1.46	1.70	2.57	2.51	2.68	1.75	2.18	1.04	2.21	0.67	1.42	2.92	2.93	2.72	0.89
	1.88	2.00	0.61	1.53	1.66	2.81	2.58	2.93	1.89	1.94	1.78	0.57	2.16	2.50	3.20	1.60	2.93	0.90
	1.64	1.48	0.69	2.82	1.66	2.13	4.09	1.70	1.73	2.27	0.98	2.20	1.06	2.83	1.88	2.77	1.84	0.07
	2.24	1.33	1.57	2.63	0.41	2.97	2.40	1.89	1.88	1.67	2.14	0.16	0.58	2.62	2.25	1.73	1.92	0.90
	2.03	1.70	1.10	2.47	0.40	1.83	2.74	3.22	2.47	2.20	2.16	0.58	2.16	1.99	1.48	2.58	2.24	0.89
AVERAGE RMSD	1.67	1.40	1.14	2.09	0.86	1.86	2.57	1.81	1.58	1.77	1.65	1.28	1.49	2.14	2.36	2.37	2.32	0.67

TABLE S2 f) RMSD for cross-docking of c-Met 4AP7 crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	1.50	0.45	1.59	1.89	0.11	0.52	2.52	0.50	0.48	0.22	2.06	0.16	1.69	1.88	1.98	1.93	2.27	0.25
	1.59	1.63	0.73	1.99	2.21	0.93	2.66	0.45	1.84	0.80	2.22	0.24	2.63	2.01	2.06	2.03	2.08	0.07
	1.99	1.40	0.71	1.52	2.35	1.15	1.45	2.32	1.60	0.74	1.82	2.22	2.44	1.89	2.24	2.90	2.38	0.93
	1.57	1.29	1.06	1.51	1.58	2.51	2.70	2.09	1.13	1.86	1.10	2.19	0.86	2.80	2.85	2.12	2.30	0.93
	1.23	1.18	2.11	2.96	1.58	1.87	2.67	1.90	1.72	1.84	1.04	2.20	1.08	2.47	3.00	2.02	3.06	0.94
	1.58	2.04	1.75	2.18	2.31	1.93	2.55	2.46	1.90	1.32	1.86	0.24	2.14	2.85	2.35	2.83	2.79	0.93
	2.21	1.22	1.26	2.83	2.03	1.97	2.47	1.88	1.76	2.04	1.12	0.22	1.99	2.70	2.03	2.74	2.86	0.12

	2.26	1.68	0.88	2.91	1.61	2.50	2.52	2.10	1.95	1.60	1.84	2.21	2.37	1.66	2.07	1.85	2.70	0.93
	1.71	1.68	0.85	2.82	1.89	2.84	2.70	2.97	1.38	2.38	1.88	0.26	2.02	2.40	2.75	2.42	3.07	0.93
	1.73	1.03	1.55	2.69	2.15	1.90	2.55	2.69	2.55	2.25	2.16	2.22	2.16	2.50	2.78	3.12	3.10	0.93
AVERAGE RMSD	1.74	1.36	1.25	2.33	1.78	1.81	2.48	1.94	1.63	1.50	1.71	1.22	1.94	2.32	2.41	2.40	2.66	0.69

TABLE S2 g) RMSD for cross-docking of c-Met 4DEH crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	1.20	0.80	0.45	1.84	0.34	0.60	1.68	0.23	0.30	0.13	1.96	0.17	1.71	2.08	3.35	2.28	2.34	0.92
	1.22	1.97	0.81	1.03	2.65	0.33	1.27	1.19	1.85	0.64	1.02	0.76	2.51	1.77	3.01	3.01	2.00	0.12
	1.49	1.15	0.67	1.07	2.25	0.32	1.23	2.47	1.76	1.82	1.10	2.07	2.54	2.85	1.87	2.11	3.15	0.07
	1.04	2.01	0.75	1.05	1.65	0.56	2.48	2.15	1.75	1.06	1.92	0.16	2.02	1.60	2.16	1.62	1.78	0.93
	1.97	0.75	1.82	1.04	2.90	1.79	2.87	2.04	1.86	2.09	1.94	2.17	0.99	2.81	1.62	2.80	3.00	0.93
	1.95	1.72	1.13	1.64	1.61	1.82	3.08	2.28	1.88	2.31	1.34	2.18	2.21	2.75	3.15	1.68	2.00	0.92
	2.47	1.40	1.78	2.55	2.26	1.82	2.46	0.54	2.10	1.58	1.21	2.21	0.65	1.63	2.99	2.36	2.21	0.92
	2.15	1.48	0.53	2.55	0.82	1.81	2.62	2.34	0.42	1.18	2.10	0.74	2.14	2.02	2.64	2.11	1.96	0.93
	1.87	1.48	0.81	2.12	2.68	2.05	1.36	2.83	2.12	1.16	2.12	0.19	1.69	1.67	2.34	2.62	2.61	0.92
	1.35	1.11	0.70	2.05	1.59	1.95	3.44	2.07	1.24	0.72	2.06	2.17	2.09	2.49	1.90	2.89	2.06	0.94
AVERAGE RMSD	1.67	1.39	0.94	1.69	1.87	1.31	2.25	1.81	1.53	1.27	1.68	1.28	1.85	2.17	2.50	2.35	2.31	0.76

TABLE S2 h) RMSD for cross-docking of c-Met 4XYF crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	1.23	1.11	1.68	2.52	0.54	0.70	0.19	0.62	0.17	0.19	1.94	0.47	1.74	2.96	2.34	1.87	3.22	0.92
	1.99	1.24	1.18	2.39	0.21	0.53	0.99	0.12	1.83	1.81	0.97	0.46	2.53	2.16	1.71	1.97	1.82	0.10
	1.93	1.93	0.76	0.97	2.52	0.51	2.20	2.04	1.83	0.64	1.87	0.18	2.02	1.83	3.43	2.11	2.01	0.92
	1.47	0.48	1.05	1.03	2.36	0.60	2.03	1.63	1.79	0.77	1.20	2.13	2.12	1.65	2.20	2.24	2.30	0.93
	2.08	0.65	0.77	2.36	2.28	0.17	3.07	2.03	1.84	2.31	1.20	0.65	0.84	1.68	2.23	1.84	2.92	0.10

	2.15	1.71	0.44	0.94	2.43	1.81	2.75	1.48	1.86	2.14	1.10	2.26	2.26	2.76	2.03	2.34	1.96	0.92
	1.65	1.69	0.72	1.98	2.49	1.86	2.19	0.70	1.79	2.40	2.01	0.15	2.51	1.63	1.86	2.16	2.00	0.92
	2.47	1.73	1.79	1.99	2.98	0.61	1.99	2.56	1.82	2.07	2.10	2.16	1.63	1.98	1.93	2.89	2.21	0.93
	1.74	0.74	0.70	1.45	0.87	1.84	1.11	0.42	1.82	2.22	1.91	2.21	2.15	2.57	3.19	2.05	2.57	0.93
	2.26	1.25	0.31	2.08	0.71	0.64	2.77	2.07	2.71	0.77	1.18	0.65	0.74	1.73	1.67	2.66	2.72	0.93
AVERAGE RMSD	1.90	1.26	0.94	1.77	1.74	0.93	1.93	1.37	1.74	1.53	1.55	1.13	1.85	2.09	2.26	2.22	2.37	0.76

TABLE S2 i) RMSD for cross-docking of c-Met 5EOB crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	1.24	1.15	1.66	2.60	0.37	0.66	0.89	3.41	0.33	0.24	1.15	0.64	1.72	1.87	2.30	2.16	2.22	0.12
	1.16	1.65	1.29	1.67	2.44	0.54	0.15	2.49	0.34	0.69	1.83	0.71	2.49	2.09	2.02	3.14	2.03	0.05
	1.48	1.94	0.71	2.49	3.18	0.34	0.95	2.79	1.71	1.80	0.91	2.12	1.81	2.76	2.36	2.10	1.91	0.93
	2.15	1.97	1.88	2.49	2.20	0.26	0.37	3.70	1.72	1.91	1.95	2.20	2.47	1.59	3.20	1.86	3.24	0.05
	1.93	1.89	1.93	2.16	2.98	0.43	1.93	2.72	1.79	1.95	1.18	0.30	0.70	2.05	2.98	2.96	1.75	0.92
	2.15	0.43	0.87	1.39	0.57	0.83	2.13	2.72	1.76	1.92	0.84	2.09	2.01	2.51	2.15	1.96	3.07	0.94
	1.95	0.52	0.71	2.18	0.00	1.83	2.14	2.53	1.97	0.86	1.23	0.17	2.07	1.71	1.78	2.05	2.08	0.93
	2.51	0.86	0.26	0.97	1.74	0.47	2.61	2.75	0.51	2.18	2.04	2.18	0.93	1.87	1.98	1.78	2.04	0.11
	0.99	1.44	1.48	1.56	1.35	1.85	2.00	3.02	1.17	1.90	1.10	2.22	2.24	1.94	2.17	3.18	1.96	0.93
	1.44	1.91	1.84	2.61	1.80	0.32	2.61	2.96	1.84	2.04	2.13	0.27	1.75	2.65	2.11	2.84	2.20	0.94
AVERAGE RMSD	1.70	1.38	1.26	2.01	1.66	0.75	1.58	2.91	1.31	1.55	1.44	1.29	1.82	2.10	2.30	2.40	2.25	0.59

TABLE S2 j) RMSD for cross-docking of c-Met 5UAB crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	1.16	1.96	2.00	0.97	0.19	0.64	0.40	1.80	0.31	0.09	1.92	0.60	1.78	2.03	2.45	2.05	2.22	0.07
	1.95	0.87	0.76	2.68	0.67	0.64	1.00	1.34	0.77	0.65	2.11	2.13	2.49	2.91	2.09	2.14	2.36	0.07
	1.18	1.07	1.68	1.63	2.68	0.18	1.15	1.69	2.02	1.83	1.23	2.07	2.52	2.19	2.08	3.19	3.17	0.84

	0.98	0.90	0.68	1.58	1.69	0.17	2.00	1.58	0.90	1.84	0.90	2.13	2.44	2.17	2.51	2.26	2.99	0.92
	0.97	1.96	1.26	1.90	2.43	0.27	2.08	1.72	2.85	0.35	1.04	0.15	2.51	1.77	3.13	2.09	2.41	0.94
	2.04	1.86	1.86	1.22	2.86	0.80	2.84	1.97	2.01	2.17	2.02	0.23	0.82	3.28	2.26	1.86	1.91	0.93
	1.47	1.91	0.71	1.13	2.29	0.34	2.01	2.65	1.96	2.07	1.05	2.09	1.96	2.87	3.49	1.82	1.97	0.43
	1.84	1.59	0.78	1.85	1.67	0.71	2.22	1.70	2.20	1.91	1.91	0.13	1.68	3.10	2.65	2.97	3.43	0.09
	2.50	1.33	0.40	1.88	2.18	0.59	2.56	2.41	2.63	2.40	2.17	2.20	2.11	2.55	1.80	2.33	2.81	0.93
	2.11	1.40	0.25	1.67	1.66	0.57	1.96	2.34	2.75	1.39	1.13	2.20	2.20	2.68	3.20	2.79	3.06	0.93
AVERAGE RMSD	1.62	1.48	1.04	1.65	1.83	0.49	1.82	1.92	1.84	1.47	1.55	1.39	2.05	2.56	2.57	2.35	2.63	0.62

TABLE S2 k) RMSD for cross-docking of c-Met 5YA5 crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	1.23	2.01	1.01	1.01	0.31	0.70	0.22	1.20	0.53	0.15	1.87	0.18	1.79	1.97	2.54	1.82	2.30	0.91
	1.49	1.40	1.18	1.18	0.41	0.73	0.46	1.37	0.19	1.69	1.20	0.66	1.66	1.93	2.33	2.12	3.25	0.18
	1.16	1.38	1.22	1.22	2.76	0.32	1.04	1.47	0.94	1.74	1.02	2.04	2.48	2.04	2.11	2.23	2.06	0.05
	1.98	1.49	0.68	0.68	2.35	0.57	2.14	1.67	2.03	1.96	1.31	2.23	2.54	2.14	3.48	1.79	3.02	0.93
	1.44	1.96	0.68	0.68	1.61	0.51	1.96	1.69	2.12	2.40	2.13	0.21	2.45	3.12	2.71	1.65	1.88	0.93
	2.18	1.98	0.82	0.82	2.22	0.78	2.20	1.19	1.94	1.75	1.98	2.21	2.32	2.87	3.34	2.10	2.20	0.93
	1.90	0.30	1.51	1.51	1.68	0.74	1.98	4.57	1.83	1.78	1.25	2.08	0.74	1.89	2.20	3.41	2.09	0.93
	1.52	2.11	0.68	0.68	1.60	0.21	2.20	4.74	1.70	0.40	1.85	0.13	1.96	2.01	3.00	3.05	1.99	0.93
	2.03	1.69	0.45	0.45	3.18	1.68	2.81	2.66	1.94	0.31	1.03	2.20	2.49	2.08	2.11	1.99	3.01	0.93
	2.50	0.45	1.68	1.68	0.81	0.52	2.13	2.77	2.36	1.21	2.02	2.19	2.20	1.80	2.14	2.88	2.01	0.08
AVERAGE RMSD	1.74	1.48	0.99	0.99	1.69	0.68	1.71	2.33	1.56	1.34	1.57	1.41	2.06	2.19	2.60	2.30	2.38	0.68

TABLE S2 l) RMSD for cross-docking of c-Met 73BQ crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	-	-	-	2.09	-	-	-	-	-	-	-	0.85	-	-	-	-	-	0.06

	-	-	-	1.97	-	-	-	-	-	-	-	1.85	-	-	-	-	-	0.93
	-	-	-	1.99	-	-	-	-	-	-	-	0.47	-	-	-	-	-	0.92
	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.91	-	-	-	-	-	0.92
	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.99	-	-	-	-	-	0.09
	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.60	-	-	-	-	-	0.94
	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.73	-	-	-	-	-	0.94
	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.59	-	-	-	-	-	0.93
	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.84	-	-	-	-	-	0.93
	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.16	-	-	-	-	-	0.08
AVERAGE RMSD	-	-	-	2.02	-	-	-	-	-	-	-	1.10	-	-	-	-	-	0.68

TABLE S2 m) RMSD for cross-docking of c-Met 7B3V crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	2.61	1.24	3.24	2.60	2.33	1.59	2.83	3.04	2.16	1.98	1.45	0.67	2.29	1.74	1.96	2.24	2.14	0.93
	2.23	1.58	3.21	2.69	2.32	1.73	2.70	3.40	2.38	1.73	2.89	1.61	1.47	2.33	1.80	2.43	1.49	0.09
	1.98	1.93	3.24	2.73	2.92	1.53	1.80	3.07	2.21	2.44	2.10	1.92	1.66	1.49	1.69	2.01	1.65	0.94
	2.43	1.13	2.33	3.06	2.57	1.89	1.90	3.40	2.79	2.61	2.27	1.90	2.12	2.17	2.16	2.21	2.25	0.08
	2.50	1.84	3.20	3.28	1.90	1.55	2.09	3.27	2.45	2.80	2.86	1.54	2.32	1.65	1.98	2.04	1.30	0.93
	2.66	1.18	3.24	1.37	1.59	1.76	2.26	3.29	2.27	2.66	2.62	1.04	1.91	1.35	2.05	2.06	1.21	0.03
	2.32	1.00	2.45	1.46	2.49	1.33	2.00	3.82	1.74	1.87	2.87	1.61	1.74	1.49	2.57	2.11	1.62	0.93
	2.15	1.58	2.37	0.82	2.38	1.86	2.17	3.32	2.24	2.22	1.71	1.71	1.70	2.02	1.75	2.22	1.75	0.93
	2.19	1.09	2.38	1.67	2.40	1.23	2.31	3.12	2.39	2.26	2.56	2.12	0.76	1.27	1.85	1.94	1.68	0.94
	2.35	1.80	2.51	0.94	0.73	2.33	2.29	3.67	2.39	1.39	1.84	1.38	0.33	1.46	2.13	2.47	2.10	0.93
AVERAGE RMSD	2.34	1.44	2.82	2.06	2.16	1.68	2.23	3.34	2.30	2.20	2.32	1.55	1.63	1.70	1.99	2.17	1.72	0.67

TABLE S2 n) RMSD for cross-docking of c-Met 7B3Z crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	2.22	1.73	1.90	1.61	1.33	0.95	3.08	3.29	3.27	2.49	1.89	2.06	0.12	1.50	1.74	1.99	1.74	0.94
	2.37	1.54	2.38	2.02	3.23	1.89	2.54	3.22	2.71	2.81	2.64	1.76	1.75	1.07	1.19	1.64	1.43	0.92
	2.53	1.16	2.47	1.71	1.14	1.90	2.73	3.10	2.66	2.65	3.06	0.77	0.88	0.81	2.09	2.13	1.30	0.93
	2.53	1.15	2.42	2.76	3.11	1.01	2.71	3.07	2.25	2.33	2.05	1.40	1.67	1.51	1.38	2.14	2.02	0.11
	2.62	1.07	2.37	1.72	2.08	1.05	2.40	3.12	2.56	2.60	2.47	1.88	1.70	1.80	1.85	1.86	1.87	0.93
	1.96	1.97	2.32	2.23	1.78	2.25	2.51	2.84	2.21	2.45	1.80	1.15	2.16	1.68	2.05	1.72	1.21	0.93
	2.58	2.19	3.22	2.25	3.17	2.32	2.14	3.24	1.64	2.43	2.93	1.91	1.04	1.23	1.62	2.30	1.79	0.07
	2.31	2.14	3.11	2.78	2.82	2.32	3.12	3.39	2.61	1.84	3.02	1.98	2.07	1.14	1.45	2.40	1.42	0.94
	2.18	1.59	1.99	1.05	1.62	1.53	2.08	3.04	2.77	1.88	1.27	0.92	0.75	2.14	1.88	1.87	2.12	0.94
	2.30	1.48	2.72	2.15	1.72	2.32	2.71	3.22	2.08	1.97	1.85	1.54	0.38	1.88	1.83	2.42	1.06	0.94
AVERAGE RMSD	2.36	1.60	2.49	2.03	2.20	1.75	2.60	3.15	2.47	2.34	2.30	1.54	1.25	1.48	1.71	2.05	1.59	0.76

TABLE S2 o) RMSD for cross-docking of c-Met 7B40 crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	2.94	1.92	2.32	1.03	2.69	1.92	2.75	3.89	2.67	2.53	2.36	2.05	0.93	0.34	1.07	1.63	1.17	0.94
	3.32	1.43	2.55	1.62	2.99	1.92	2.95	3.95	3.23	2.89	2.54	2.14	0.21	2.07	1.70	2.01	1.61	0.47
	2.21	1.86	3.25	1.43	3.05	2.23	2.30	3.95	2.63	2.08	2.27	0.77	2.19	0.83	1.46	1.91	1.53	0.92
	2.42	1.44	2.53	1.74	2.45	2.23	1.87	3.28	3.15	2.24	2.83	1.64	1.53	1.09	1.61	1.54	1.46	0.29
	2.62	1.05	2.63	1.87	2.32	2.33	2.14	4.06	2.75	2.31	2.25	1.04	1.88	1.05	1.11	2.01	1.73	0.91
	2.62	1.76	2.35	1.77	2.79	2.33	1.90	3.81	2.76	1.50	2.98	1.60	1.72	1.50	0.73	1.70	1.88	0.06
	2.33	1.28	3.11	1.52	2.78	2.30	2.97	3.08	2.92	2.58	2.90	1.84	1.05	1.62	1.89	2.39	0.58	0.93
	2.87	1.56	2.89	3.06	3.07	2.30	2.79	2.71	2.28	2.64	2.34	2.12	0.89	1.55	1.78	2.26	2.16	0.93
	2.55	1.17	2.39	0.90	2.75	2.01	2.19	1.37	2.36	2.19	2.38	2.17	2.15	1.04	1.74	2.29	1.08	0.92
	2.64	2.05	2.51	1.43	1.94	2.17	2.75	2.37	2.29	2.49	2.42	1.65	0.41	2.10	2.15	2.09	1.72	0.94
AVERAGE RMSD	2.65	1.55	2.65	1.64	2.68	2.17	2.46	3.25	2.70	2.35	2.53	1.70	1.30	1.32	1.53	1.98	1.49	0.73

TABLE S2 p) RMSD for cross-docking of c-Met 7B41 crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG	7B44 LIG
	3.55	1.90	2.33	3.54	2.67	2.20	3.00	3.79	2.62	2.57	2.22	0.81	0.24	0.65	0.92	1.41	0.93	0.94
	2.87	2.05	2.57	2.83	2.65	2.21	2.75	3.72	2.70	2.33	2.78	1.98	0.81	1.42	1.17	1.74	0.54	0.24
	3.04	1.70	2.95	2.81	2.85	2.16	2.14	3.88	3.14	2.50	2.03	2.00	1.07	2.23	1.39	1.74	1.88	0.95
	2.69	1.15	2.33	1.56	2.37	2.16	2.93	3.82	2.77	2.57	2.92	2.18	2.15	0.94	1.14	1.62	1.00	0.07
	2.86	1.25	2.60	0.95	2.61	2.28	1.88	3.31	2.36	2.26	2.56	1.36	1.93	2.29	0.97	1.24	1.70	0.93
	2.30	1.46	2.59	3.06	2.70	2.28	2.97	3.00	2.67	2.50	3.21	1.44	1.72	1.01	0.98	2.05	1.35	0.33
	3.26	1.59	2.79	3.22	2.28	2.29	2.28	4.11	2.21	2.41	2.40	2.09	1.58	1.81	0.48	2.30	1.10	0.93
	2.12	1.53	2.36	3.32	2.63	2.25	2.88	4.26	2.28	2.74	2.86	1.60	0.84	0.72	1.69	1.61	0.97	0.91
	2.44	2.07	2.79	1.32	3.14	2.40	1.96	2.91	2.27	2.72	2.91	1.89	0.25	1.31	0.51	1.84	1.38	0.93
	2.75	1.47	2.84	1.74	2.56	2.34	3.01	2.94	2.39	2.57	2.93	2.00	0.49	1.82	1.54	1.63	1.62	0.94
AVERAGE RMSD	2.79	1.62	2.62	2.43	2.65	2.26	2.58	3.57	2.54	2.52	2.68	1.73	1.11	1.42	1.08	1.72	1.25	0.72

TABLE S2 q) RMSD for cross-docking of c-Met 7B42 crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B44 LIG
	2.22	1.84	2.65	1.48	2.67	2.14	2.99	3.95	0.15	2.40	2.62	0.62	0.24	1.95	1.67	1.08	1.57	0.93
	2.61	1.94	3.05	3.01	2.60	2.15	1.88	4.04	0.58	2.39	2.96	1.18	0.98	1.26	1.24	1.32	1.03	0.28
	3.11	1.63	3.12	3.04	2.31	2.34	3.08	3.15	2.03	2.53	2.48	2.09	1.73	2.35	1.33	1.51	1.88	0.94
	2.80	1.21	3.07	1.34	2.84	2.32	2.47	3.70	1.76	2.83	2.35	2.03	0.98	0.89	1.92	1.81	0.51	0.07
	2.85	1.61	3.24	2.16	2.39	2.29	2.78	3.33	1.60	2.18	2.51	2.26	1.69	2.04	1.49	1.95	1.40	0.08
	3.19	1.55	2.83	1.74	2.23	2.32	2.72	3.49	2.19	2.53	2.39	1.90	2.18	1.53	1.75	1.77	1.55	0.91
	2.17	1.08	2.25	1.07	2.81	2.33	2.97	3.32	1.69	2.82	2.45	0.71	0.90	1.47	0.40	1.75	2.13	0.94
	2.44	1.41	2.65	1.83	2.40	2.30	2.94	3.33	0.58	2.79	2.97	2.17	0.42	1.96	1.24	1.71	1.31	0.93
	2.68	1.40	2.31	1.93	2.58	2.30	1.92	3.22	2.02	1.43	2.74	0.34	1.87	0.94	1.42	2.10	1.66	0.93
	2.57	1.76	2.39	1.93	2.16	2.33	2.16	3.14	2.07	2.43	3.01	2.04	2.10	1.76	2.19	2.11	1.01	0.93
AVERAGE RMSD	2.66	1.54	2.76	1.95	2.50	2.28	2.59	3.47	1.47	2.43	2.65	1.53	1.31	1.61	1.47	1.71	1.41	0.69

TABLE S2 r) RMSD for cross-docking of c-Met 7B43 crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B44 LIG
	2.47	1.52	0.00	2.86	3.04	2.02	2.37	3.86	2.61	2.43	2.16	0.46	0.99	0.40	0.89	1.04	1.65	0.94
	2.26	1.72	3.31	2.86	2.72	2.03	3.18	3.80	3.32	2.34	2.54	2.10	0.49	1.02	0.47	0.76	1.45	0.41
	3.46	1.23	3.31	3.09	2.75	2.28	1.87	4.26	2.63	2.80	2.36	1.47	1.07	1.98	1.74	1.67	1.86	0.07
	3.17	1.20	2.82	2.93	2.72	2.34	2.21	3.56	2.83	2.52	2.50	2.14	1.66	1.76	1.36	1.46	2.34	0.92
	2.90	1.51	3.06	2.87	2.56	2.31	2.43	3.62	2.82	2.61	2.46	1.91	1.86	1.13	1.37	1.55	2.31	0.93
	2.46	1.49	0.00	1.13	-	2.26	2.81	3.88	2.65	2.94	3.02	2.25	1.80	2.38	1.72	1.45	2.17	0.95
	2.72	1.44	1.41	2.95	2.60	2.07	3.03	2.68	2.83	2.28	2.29	0.87	1.13	1.90	1.73	2.29	1.76	0.13
	2.36	1.94	2.51	2.84	2.70	2.26	2.28	2.76	3.08	2.29	2.44	0.71	2.13	0.95	1.80	2.18	2.41	0.93
	2.53	1.96	2.57	3.03	2.62	2.30	2.65	2.65	1.82	1.94	2.67	1.98	0.86	0.54	1.53	2.11	2.56	0.13
	2.43	2.06	2.45	2.94	2.42	2.30	2.27	2.91	2.43	2.60	2.97	2.20	1.69	1.70	2.16	2.57	1.67	0.93
AVERAGE RMSD	2.68	1.61	2.14	2.75	2.68	2.22	2.51	3.40	2.70	2.48	2.54	1.61	1.37	1.38	1.48	1.71	2.02	0.63

TABLE S2 s) RMSD for cross-docking of c-Met 7B44 crystal

Non-cognate ligands	2WGJ LIG	3F66 LIG	3ZXZ LIG	3ZZE LIG	4AOI LIG	4AP7 LIG	4DEH LIG	4XYF LIG	5EOB LIG	5UAB LIG	5YA5 LIG	7B3Q LIG	7B3V LIG	7B3Z LIG	7B40 LIG	7B41 LIG	7B42 LIG	7B43 LIG
	2.22	1.84	2.65	1.48	2.67	2.14	2.99	3.95	2.61	2.40	2.62	0.62	0.24	1.95	1.67	1.08	1.73	1.57
	2.61	1.94	3.05	3.01	2.60	2.15	1.88	4.04	3.32	2.39	2.96	1.18	0.98	1.26	1.24	1.32	1.62	1.03
	3.11	1.63	3.12	3.04	2.31	2.34	3.08	3.15	2.63	2.53	2.48	2.09	1.73	2.35	1.33	1.51	0.95	1.88
	2.80	1.21	3.07	1.34	2.84	2.32	2.47	3.70	2.83	2.83	2.35	2.03	0.98	0.89	1.92	1.81	1.50	0.51
	2.85	1.61	3.24	2.16	2.39	2.29	2.78	3.33	2.82	2.18	2.51	2.26	1.69	2.04	1.49	1.95	2.23	1.40
	3.19	1.55	2.83	1.74	2.23	2.32	2.72	3.49	2.65	2.53	2.39	1.90	2.18	1.53	1.75	1.77	1.45	1.55
	2.17	1.08	2.25	1.07	2.81	2.33	2.97	3.32	2.83	2.82	2.45	0.71	0.90	1.47	0.40	1.75	1.71	2.13
	2.44	1.41	2.65	1.83	2.40	2.30	2.94	3.33	3.08	2.79	2.97	2.17	0.42	1.96	1.24	1.71	2.17	1.31
	2.68	1.40	2.31	1.93	2.58	2.30	1.92	3.22	1.82	1.43	2.74	0.34	1.87	0.94	1.42	2.10	2.59	1.66
	2.57	1.76	2.39	1.93	2.16	2.33	2.16	3.14	2.43	2.43	3.01	2.04	2.10	1.76	2.19	2.11	2.13	1.01

AVERAGE RMSD	2.66	1.54	2.76	1.95	2.50	2.28	2.59	3.47	2.70	2.43	2.65	1.53	1.31	1.61	1.47	1.71	1.81	1.41
-----------------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------